

минимального машинного времени были получены с использованием гибридного метода ONIOM(DFT/PM3) для оптимизации геометрии молекулы, DFT B3LYP 6-31G** для расчета колебательных спектров и URDFT B3LYP 6-31G** для расчета электронных спектров поглощения. Расчет устойчивости модельных соединений проведен методом DFT B3LYP 6-31G**. Полученные расчетные ИК-спектры анализируемых соединений совпадают со спектрами снятыми для синтезированного комплекса кобальта с этилендиамином по основным характеристическим частотам спектра. Данные рентгеноструктурного анализа подтверждают расчетную геометрию комплекса, что свидетельствует об адекватности выбранной методики расчета, которая позволяет оптимизировать машинное время.

Кроме того, в работе рассматриваются пути синтеза комплекса Co(III) с DETA, с предварительным квантово-химическим исследованием, прогнозирование его возможной структуры, химической устойчивости, колебательных и электронных спектров поглощения.

АССОЦИАЦИЯ ВИТАМИНА В₁ С НАНОКЛАСТЕРНЫМ ПОЛИОКСОМЕТАЛЛАТОМ Mo₇₂Fe₃₀

Гагарин И.Д., Остроушко А.А.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Пористые сферические нанокластерные полиоксометаллаты кеплератного (фуллереноподобного) типа – Mo₇₂Fe₃₀ [1] рассматриваются в качестве перспективных средств адресной доставки биологически активных веществ [2, 3]. Они практически нетоксичны для теплокровных животных, не накапливаются в организме. Благодаря тому, что полиоксометаллаты образуют многозарядные ионы в водных растворах, они транспортируются под действием электрического поля и способны проникать через кожные покровы. Установлено образование ассоциатов полиоксометаллатов с макромолекулами биосовместимых водорастворимых полимеров [4], лекарственными средствами, в частности, иммуномодулятором 2-морфолино-5-фенил-6Н-1,3,4-тиадазином. Для изучения процессов электрофоретического транспорта ассоциатов на основе полиоксометаллатов нами выбрана в данный момент модельная система: витамин В₁ (тиамин гидрохлорид) – Mo₇₂Fe₃₀. Эта система удобна с точки зрения возможности идентификации и количественного определения транспортируемого компонента с использованием хроматографических и люминесцентных методов анализа.

На первом этапе исследований процессов ассоциации в изучаемой системе нами определена изoeлектрическая точка образования ассоциатов на основании результатов измерения ζ -потенциала образующихся частиц (Brookhaven 90BI-Zeta Plus). указанная точка находится вблизи молярного соотношения витамин B₁–Mo₇₂Fe₃₀ (33±7):1. Спектрофотометрически методом метод молярных отношений также проведено определение соотношения компонентов в устойчивом ассоциате. Ионные ассоциаты между полианионом Mo₇₂Fe₃₀ и катионами тиамина достаточно прочны, что при высоких концентрациях компонентов (порядка $1,5 \cdot 10^{-4}$ М) приводит к возникновению суспензии их малорастворимых форм. Размер частиц в них составляет от сотен нанометров до единиц микрометров. Суспензионные формы ассоциатов также как и растворимые могут быть использованы в медицине, в частности, для создания препаратов пролонгированного действия по аналогии с суспензионными формами инсулина.

1. Müller A., Sarkar S., Shah S.Q.N. et al. // Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 1999. V. 38. P. 3238.

2. Ostroushko A.A., Danilova I.G., Gette I.F. et al. // J. of Biomaterials and Nanobiotechnology. 2011. V. 2. P. 557–560.

3. Остроушко А.А., Гетте И.Ф., Данилова И.Г. и др. Исследование возможности введения железомолибденовых букиболов в организм методом электрофореза // Рос. нанотехнологии. 2014. № 9–10(9). С. 101–105.

4. Остроушко А.А., Сафронов А.П., Тонкушина М.О. Термохимическое исследование взаимодействия нанокластерных полиоксомолибдатов с полимерами в пленочных композициях // Журн. физ. химии. 2014. Т. 88, № 2. С. 306–311.

Результаты исследований получены в рамках выполнения государственного задания Министерства образования и науки РФ, работа поддержана грантом РФФИ 15-03-03603.

ТВЕРДОФАЗНЫЙ СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ Sr_{6-x}Zn_xTa₂O₁₁

Галиев П.Р., Подкорытов А.Л.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Сложные танталаты могут быть использованы во многих областях техники: в устройствах, где тугоплавкость, механическая проч-